



TITLE:

13. Ce不純物による磁気抵抗: 結晶場分裂を考慮した場合(基研短期研究会「重い電子系の理論」報告, 研究会報告)

AUTHOR(S):

半澤, 克郎; 芳田, 奎; 山田, 耕作

CITATION:

半澤, 克郎 ...[et al]. 13. Ce不純物による磁気抵抗: 結晶場分裂を考慮した場合(基研短期研究会「重い電子系の理論」報告, 研究会報告). 物性研究 1986, 47(2): 168-171

ISSUE DATE:

1986-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92336>

RIGHT:

近藤効果による遮蔽は、この系で重要である。この結果は、Razafimandimby らの近藤効果により電子・格子相互作用が増幅されるという指摘にたいして、むしろ近藤効果は電子・格子相互作用を小さくするということで、結果としては全く逆である。

ここでは、近藤効果による遮蔽があっても、近藤温度がそれほど低くなく（すなわち、遮蔽効果が小さい）、また f イオンの回りの配位子が複雑で、いろいろなモードのフォノンが利用できる場合には、引力が同一サイトの斥力に打ち勝てる場合もあることを示した。

参考文献

- 1) F. J. Ohkawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 4344.
- 2) H. Razafimandimby, P. Fulde and J. Keller, Z. Phys. **B54** (1984) 111.
- 3) F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 1389.
- 4) F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 2527.
- 5) F. J. Ohkawa, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.

13. Ce 不純物による磁気抵抗 — 結晶場分裂を考慮した場合

東理大・理工 半澤 克郎, 芳田 奎
京大・基研 山田 耕作

高密度近藤系の Ce 化合物 (CeAl_3 , CeCu_2Si_2 等), および, その合金 (Ce を La などで置換したもの) の電気抵抗・磁気抵抗を議論する目的で, Ce イオンの結晶場分裂を考慮した場合の $s-f$ 交換相互作用による (基底状態における) 磁気抵抗の定式化と計算を行なう。

ハミルトニアンは,

$$H = H_c + H_f + H_{ex} \quad (1)$$

ここで, H_c は伝導電子のエネルギーである。 H_f は, Ce イオンの $4f$ 電子のエネルギーであって, スピン-軌道相互作用, 結晶場, 外部磁場によるゼーマン・エネルギーを考慮して, 全体を対角化した表示をとる。その固有状態を区別する添字を M とする。 $s-f$ 交換相互作用は次の様にとる。

$$H_{\text{ex}} = J \sum_{kk'MM'} c_{kM}^+ c_{k'M'} (f_{M'}^+ f_M - b \delta_{MM'}) \quad (2)$$

ここに、 $f_M^+ \cdot f_M$ は、固有状態 M にある 4f 電子の生成・消滅演算子、 $c_{kM}^+ \cdot c_{kM}$ は、波数 k および、 M と同じ対称性を持つ部分波状態の生成・消滅演算子である。 b はポテンシャル散乱を差し引くための定数、 J は相互作用定数であって k, k', M, M' によらないとする。

Ce^{3+} を考えるため、4f 電子の数は 1 とする。

このモデルの基底状態の波動関数は一般に、

$$\Psi_{\text{GS}} = \sum_M C^M \Phi^M \psi^M \quad (3)$$

と表わされる。ここに、 Φ^M は 4f 電子の M なる固有関数、 ψ^M は伝導電子の波動関数、 C^M は係数である。波動関数として規格化されたものを用いると、 $|C^M|^2$ が、4f が M -状態にある重率を表わす。4f 電子と結合して一重項を形成するために Ce のまわりに集まる伝導電子の数は、次の様に決められる。

部分波表示の M 成分の状態にある、Ce のまわりに局在した伝導電子の数演算を \hat{n}_M とし、その $\psi^{M'}$ による期待値を $n_M^{M'}$ とする。Anderson の直交定理 [1] により

$$n_M^M + 1 = n_M^{M'(\neq M)} \quad (4)$$

相殺定理 [2] により

$$\langle \Psi_{\text{GS}} | \hat{n}_M | \Psi_{\text{GS}} \rangle = \sum_{M'} |C^{M'}|^2 n_M^{M'} = 0 \quad (5)$$

(4), (5) から

$$n_M^M + 1 = n_M^{M'(\neq M)} = |C^M|^2 \quad (6)$$

すなわち、 $|C^M|^2$ を求めれば、局在伝導電子の数が決まる。

さらに、Friedel の総和則により、Fermi 面上の伝導電子の位相のずれが、

$$\delta_M^{M'} = \pi n_M^{M'}$$

によって得られる。以下、標準的な計算により、電気抵抗の表式が次の様に求まる。

$$\frac{R_{\mu\nu}}{R_0} = \left[\frac{3}{8\pi} \sum_{\sigma} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \hat{k}_{\mu} \hat{k}_{\nu} / \sum_M |\langle \mathbf{k}\sigma | k_F M \rangle|^2 \sin^2(\pi |C^M|^2) \right]^{-1} \quad (7)$$

ここで、 R_0 は s-波散乱のユニタリティ極限の抵抗の値、 $\mu \cdot \nu$ はそれぞれ電流・電場に平

行な軸を表わす。 σ はスピン, $\int d\Omega_k$ は Fermi 面上の波動ベクトル \mathbf{k} の立体角に関する積分, $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ は平面波, $|kM\rangle$ は部分波表示の波動関数である。

(7) 式により, H_f の固有状態と, その各状態の基底状態における重率 $|C^M|^2$ が求まれば, Ω_k - 積分を数値的に行なうことにより抵抗が計算される。以下に, 計算結果のうち注目すべき2点について述べる。

(i) スピン-軌道相互作用および結晶場の基底状態が,

$$a \left| j = \frac{5}{2}, j_z = \pm \frac{5}{2} \right\rangle + b \left| j = \frac{5}{2}, j_z = \mp \frac{3}{2} \right\rangle \quad (8)$$

で表わされる場合を考える。 CeAl_2 , CeAl_3 , CeCu_2Si_2 では, この二重項が基底状態であると考えられる。ただし,

$$\text{CeAl}_2 \text{ では, } a = 1/\sqrt{6}, \quad b = -\sqrt{5}/\sqrt{6},$$

$$\text{CeAl}_3 \text{ では, } a = 0, \quad b = 1,$$

CeCu_2Si_2 では, a , b の値として, いくつかの可能性が考えられる [3]。

今, スピン-軌道および結晶場による分裂が無限大であると仮定すると, 零磁場では,

$$|C^M|^2 = 1/2$$

であり, (7) 式の被積分関数の分母は一般に,

$$\cos \theta_k = \pm 1$$

に零点を持つ。この零点の Ω_k - 積分への寄与は, $\mu = \nu = z$ に対して対数発散となる。($b = 0$ の場合は -1 乗の発散となる。) 従って, z - 軸方向の電流に対しては, 抵抗は零となる。この零点は, 有限の結晶場分裂のもとでは消え抵抗は有限の値になる。しかし, 分裂が結合エネルギー (近藤温度) より大きければ, その影響の痕跡は残り, z 軸方向の抵抗はかなり小さい値となる。 CeCu_2Si_2 で, c 軸 (z 軸) 方向の電流の抵抗が a 軸方向のそれより小さく観測されることは, この効果で定性的に説明できる。

(ii) 結晶場分裂の準位構造 (各準位の波動関数—上の例では (8) 式の a と b) と磁場の方向

によっては、磁気抵抗にピークが現われることがある。

最も簡単な例は、上であげた CeAl_3 の結晶場で、 z 軸方向の磁場の場合である。まず、磁場を零から増加させていくと、 $4f$ 状態の各二重項は分裂していき、近藤効果は小さくなって抵抗は減少する。しかし、さらに磁場が大きくなると、結晶場の励起状態のうちの

$$|j = \frac{5}{2}, j_z = \frac{5}{2}\rangle$$

の状態がゼーマン・エネルギーの利得が最大であるため、低磁場での基底状態

$$|j_z = \frac{3}{2}\rangle$$

にエネルギー的に近づき、有限磁場で再び、 $4f$ の基底状態の縮退が生じる。この縮退のため近藤効果が再び大きくなり磁気抵抗にピークが生じる。このピークを与える磁場は、中性子散乱による結晶場分裂を用いれば 104 Tesla と評価される。

この磁気抵抗のピークの磁場の方向に対する依存性は、 CeCu_2Si_2 の結晶場準位構造を決定するのに有力であるが、中性子散乱の実験、および、帯磁率の解析 [3] を考慮して計算すると、200–400 Tesla の磁場が必要であると見積られる。

- 1) P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **18** (1967) 1049; Phys. Rev. **164** (1967) 352.
- 2) P. W. Anderson, Phys. Rev. **124** (1961) 41.
- 3) K. Hanzawa, K. Yamada and K. Yosida, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 641.

14. 超伝導における引力の起源

名大・理 金 彪, 松浦 民房, 黒田 義浩

我々のグループでは、これまで周期的アンダーソン模型を用いた微視論的考察によって高密度近藤系の諸性質を調べて来た。我々の考察を進めて行くに当たっての基本方針は、単一不純物問題で知られている近藤共鳴状態の解を出発点として、隣接した磁性イオンの周りに生じた近藤共鳴状態間の相関効果による補正を摂動論的に考慮して行くことによって問題の真相に近付こうとするものである。その結果、これまでの我々の考察で判明した事は、近藤温度 T_K が反